UNIVERSIDAD DE GUANAJUATO

DIVISIÓN DE CIENCIAS NATURALES Y EXACTAS

LICENCIATURA EN INGENIERIA QUIMICA



DISEÑO Y SIMULACIÓN DE PROCESOS Y PRODUCTOS

DR. JUAN GABRIEL SEGOVIA HERNÁNDEZ

PROYECTO FINAL

Almendarez Verdín José Israel

Álvarez Cortes Vanessa

Casillas Hernández Andrea Isabel

Celaya Arteaga Xochitl Citlalli

Chacón Martínez Jessica

Chávez Romero Aldonza Stephanie

GUANAJUATO, GTO. A 10 DE JUNIO DEL 2021

Índice

Proyecto Final

Instrucciones del Proyecto final

Background

A 500 kg/h, 25°C, 1 atm, waste stream has the following composition (mole percent):

- n-pentane. - 75.11 %
- Acetone. - 12.13%
- Ethanol. - 11.34%
- Water. - 1.42%

The goal of this project is to design process to separate all components. It should be designed to recover each component at a higher purity: 99.9%. We should expect heterogeneous behaviour when we see n-pentane, methanol, and water in the same mixture (two liquid phases).

Possible solution alternatives can be based on:

- Regular distillation
- Azeotropic and/or extractive distillation
- Liquid-liquid extraction

General

The entire process should be optimized using decision variables of your choosing. Decision variables should be chosen as the design variables most strongly affecting the objective function. There are topological optimization and parametric optimization. In topological optimization, which is usually done first, the best process configuration is chosen. Parametric optimization involves varying operating variables and should be done after topological optimization is complete. Some examples of parameters that can be used as decision variables are pressure and conversion; and distillation column reflux ratio.

Report Format

The written report is a very important part of the assignment. Poorly written and/or organized written reports may require re-writing. Be sure to follow the format outlined in the guidelines for written reports.

The following information, at a minimum, must appear in the main body of the final report:

1. a WORD file for the recommended optimum case,

2. a stream table containing the usual items,

3. a list of equipment for the process, costs, plus equipment specifications (presented with a reasonable number of significant figures),

4. a summary table of all utilities used,

5. a clear summary of alternatives considered and a discussion, supported with figures, of why the chosen alternative is superior,

6. a clear economic analysis which justifies the recommended case

7. a discussion section pertinent to each class plus a general discussion section for optimization of the entire process

8. a Aspen Plus report for your optimized case (in the Appendix). This must contain the equipment connectivity, thermodynamics, and overall material balance cover pages; stream flows; equipment summaries; tower profiles. It should not contain stream properties. Missing Aspen Plus information will not be requested; credit will be deducted as if the information is missing.

Deliverables

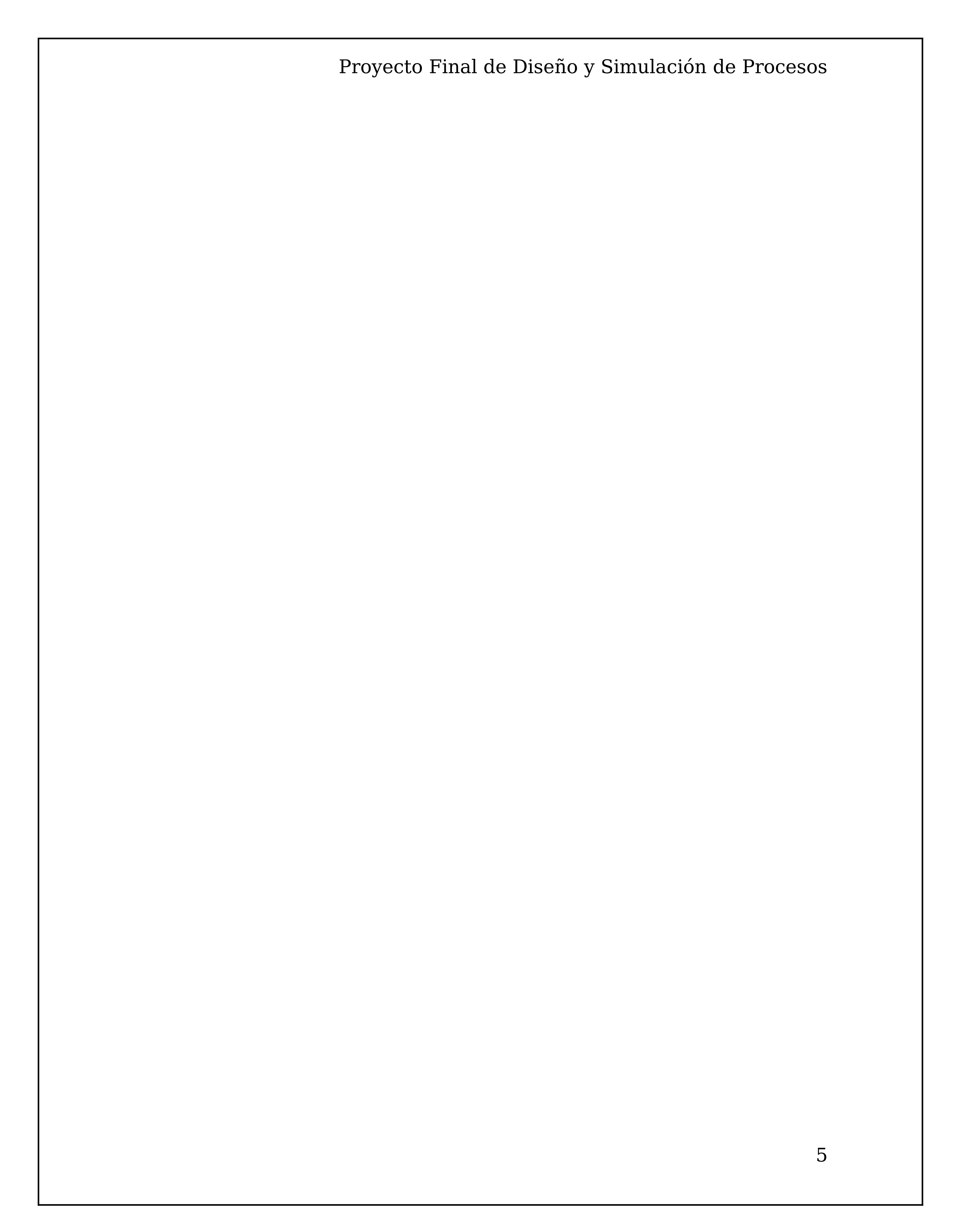
Each group must deliver a report. Each team will give an oral report in which the results of this project will be presented in a concise manner. The oral report should be between 15-20 minutes, and each group member must speak once. Reports exceeding this time limit will be stopped. A 5–10-minute question-and-answer session will follow.

Revisions

As with any open-ended problem (*i.e.*, a problem with no single correct answer), the problem statement above is deliberately vague. The possibility exists that, as you work on this problem, your questions will require revisions and/or clarifications of the problem statement. In this case is impossible that two or more teams have similar answers to the problem.

Appendix

Energy prices: electricity 41 EUR/MWh, steam (saturated, 10 bar abs.) 17 EUR/ton, cooling water 0,04 EUR/m³ at 20 °C. The plant is expected to operate 8000 h/yr.



Introducción

La separación de mezclas azeotrópicas es muy común en la industria química, los procesos utilizados para esto son la destilación convencional, destilación extractiva y extracción líquido líquido. Una mezcla azeotrópica es la que presenta uno o más azeótropos y en donde no es posible separar sus componentes por medio de una destilación simple. Un azeótropo existe cuando la composición en la fase líquida resulta ser la misma que en la fase de vapor, presentándose una limitación en la separación que se quiere lograr.

El desarrollo de alternativas de separación de mezclas azeotrópicas implica un análisis profundo del fenómeno del equilibrio entre vapor y líquido dentro de las sustancias del azeótropo y de las no idealidades que se dan en ese tipo de mezclas. Si no hay diferencia de composiciones entre la fase líquida y la fase vapor, no existe la transferencia de materia entre plato y plato, por lo que no existe separación de componentes. Para lograr la separación, es necesario modificar las condiciones de operación de la columna de destilación o emplear un agente de separación, aunque a esto ya sería una destilación extractiva, el agente extractivo o extractante modifica la volatilidad relativa de los componentes o forma un azeótropo con uno de los componentes de la mezcla para así arrastrarlo completamente a alguna de las salidas y realizar la separación efectiva con el otro componente a obtener.

La destilación azeotrópica por cambios de presión causa el desplazamiento del azeótropo modificando suficientemente la presión para romperlo o alejarlo de la región en la que se desea llevar a cabo la separación, en caso de que el azeótropo no sea sensible a cambios de presión, se debe recurrir a introducir un agente extractante.

Metodología

Lo primero que se realizó fue ingresar los componentes en Aspen ®, como se ve en la figura 1, con la finalidad de obtener las k de equilibrio y calcular la volatilidad relativa de cada uno de los compuestos.

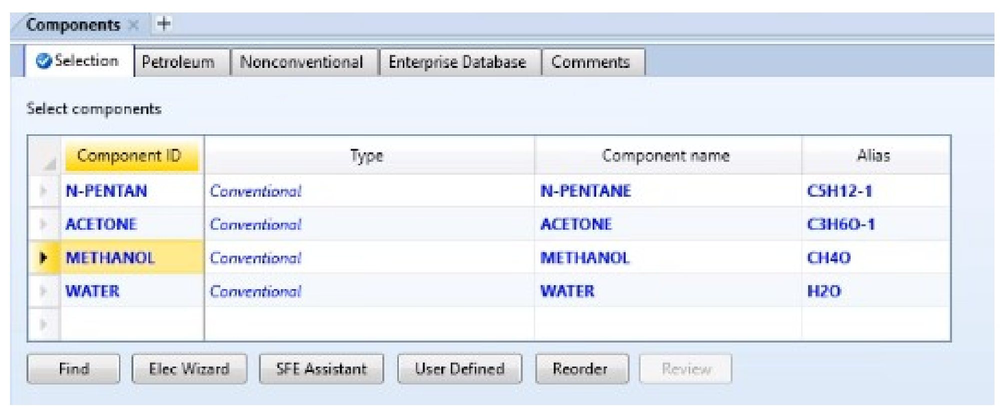


figura 1 Ingreso de los componentes en Aspen ®. Fuente: Elaboración propia, (2021).

Elección del modelo termodinámico

La mezcla que se estará separando está compuesta de metanol, agua, n-pentano y acetona. El primer par de componentes (metanol-agua) son compuestos polares.

Para el segundo par (n-pentano y acetona) partiendo de datos experimentales a tres diferentes temperaturas, utilizando la estimación de parámetros y datos críticos. Demuestran que este sistema tiene una línea crítica continua entre los dos componentes puros con un mínimo de temperatura y este comportamiento se predice correctamente por la ecuación de estado. Lo cual nos dice que el modelo termodinámico adecuado es el NRTL.

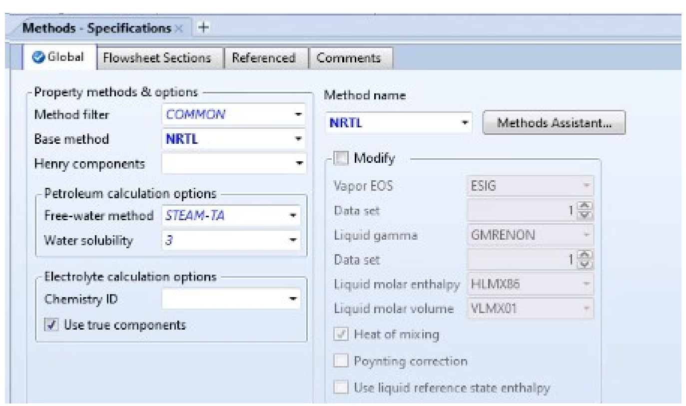


Figura 2 Selección del modelo termodinámico CHAO-SEADER. Fuente: Elaboración propia, (2021).

Balance de masa

Se procede a realizar el balance de masa de cada uno de los componentes para poder ingresarlos en Aspen ®. El problema nos da un flujo de 500 kg/h, por lo que se debe pasar a kmol/h.

Tabla 1 Condesado de los componentes

Componen	*Peso molecular*	*% fracción*

te	[kg/mol]	mol
n-Pentane	72.15	75.11
Acetone	50.08	12.13
Methanol	32.04	11.34
Water	18.015	1.42

Fuente: Elaboración propia, (2021).

Ejemplificación del componente pentano:

$$\frac{(75.11\%)(500\frac{kg}{h})}{(100\%)}=375.55\,kg/h$$

$$\left|\frac{375.55\,kg}{1\,h}\right|\left|\frac{1\,kg-mol}{72.15\,kg}\right|=5.2\,kmol/h$$

Realizando los cálculos de la metodología anterior, en la siguiente tabla se pueden observar los resultados del balance de masa.

Tabla 2 condensado de compuestos y su flujo molar en Kmol/h

Compone nte	Flujo en [kmol/h]
n-Pentane	5.2
Acetone	1.21
Methanol	2.22
Water	0.39
Total:	9.02

Fuente: Elaboración propia, (2021).

Por lo que el flujo de entrada de nuestros componentes es de 9.02 kmol/h, de acuerdo con la tabla anterior.

En la siguiente figura, se puede visualizar las condiciones de operación que el enunciado nos indica, se calcularon los flujos a través del balance de masa anterior partiendo de los datos que nos menciona el enunciado.

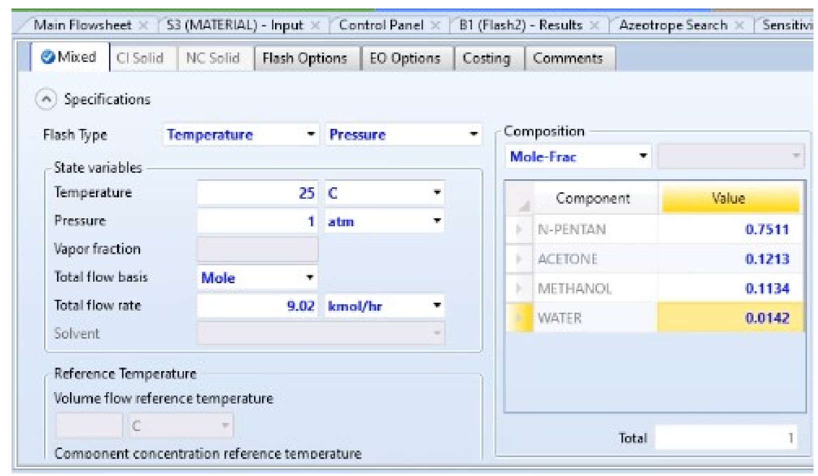
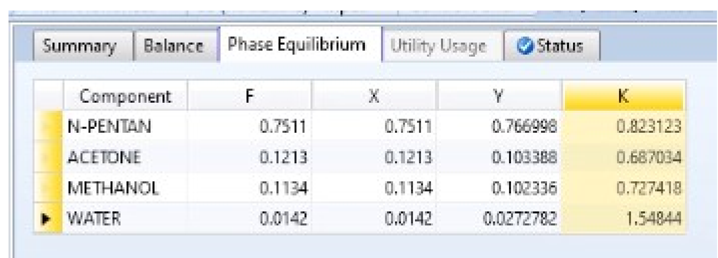


Figura 3Condiciones de operación. Fuente: Elaboración propia, (2021).

Para el cálculo de las volatilidades relativas de cada compuesto, se utiliza la siguiente formula, utilizando las k proporcionadas por el programa de ASPEN ®:

$$\square = kikj$$

A partir de las constantes de equilibrio, en la siguiente tabla se muestran las volatilidades relativas de cada componente.



Component	F	X	Y	K
N-PENTAN	0.7511	0.7511	0.766998	0.823123
ACETONE	0.1213	0.1213	0.103388	0.687034
METHANOL	0.1134	0.1134	0.102336	0.727418
WATER	0.0142	0.0142	0.0272782	1.54844

Figura 4 Constantes de equilibrio. Fuente: Elaboración propia, (2021).

Se calculan las volatilidades relativas de cada componente. Los resultados se pueden visualizar en la siguiente tabla, es importante mencionar que las volatilidades ya se encuentran ordenadas de forma decreciente.

Tabla 3 Condensado de compuestos K y volatilidad relativa

Compuesto	***K***	***Volatilidad relativa***
WATER	1.5484425	2.253807961
N-PENTAN	0.823122531	1.198081371
METHANOL	0.727417639	1.04779816
ACETONE	0.687033912	1

Fuente: Elaboración propia, (2021).

Para facilitar la selección de las reglas heurísticas, a continuación, se puede observar una tabla a forma de condensado con la volatilidad relativa y el flujo de alimentación de cada componente. A cada uno de los componentes se les asignó una letra para facilitar la visualización de los cortes.

Tabla 4 Condensado de los componentes.

Letra asignada	***Compuesto***	***Volatilidad relativa***	***Flujo de alimentación en kmol/hr***
A	*WATER*	2.253807961	5.2
B	*N-PENTAN*	1.198081371	1.21
C	*METHANOL*	1.04779816	2.22
D	*ACETONE*	1	0.39

Fuente: Elaboración propia, (2021).

Método heurístico

Después, se procede a calcular la volatilidad de acuerdo con cada uno de los pares adyacentes, como se muestra en la tabla 3, para ello se utiliza la fórmula de la volatilidad del par adyacente

$$\alpha_{ij} = \frac{\alpha i}{\alpha j}$$

Tabla 5 Volatilidad relativa de cada par adyacente.

Par adyacente	**Volatilidad del par adyacente**
A (WATER) **B (N-PENTHANE)**	1.881181041
B (N-PENTHANE) **C (METHANOL)**	1.881181041
C (METHANOL) **D (ACETONE)**	1.04779816

Fuente: Elaboración propia, (2021).

De acuerdo con la tabla anterior, y una vez que se rectificaron los parámetros de interacción binaria, se puede observar que la volatilidad del par adyacente metanol/acetona es igual a 1.04, por lo que requerimos un método diferente a la destilación ordinaria para separar estos compuestos. Este método será por destilación extractiva.

Formación del azeótropo

Para comprobar los cálculos anteriores se sacó la gráfica de formación del azeótropo ya que como se sabe este hierve a una temperatura constante y tiene el comportamiento como si fuera un solo componente dando que la fase de vapor tendrá la misma composición que la fase liquida.

Así pues, que en la siguiente grafica de metanol-acetona se puede observar que la formación del azeótropo se da a los 25° C tal como se tiene en las especificaciones iniciales, por lo tanto, está correcto.

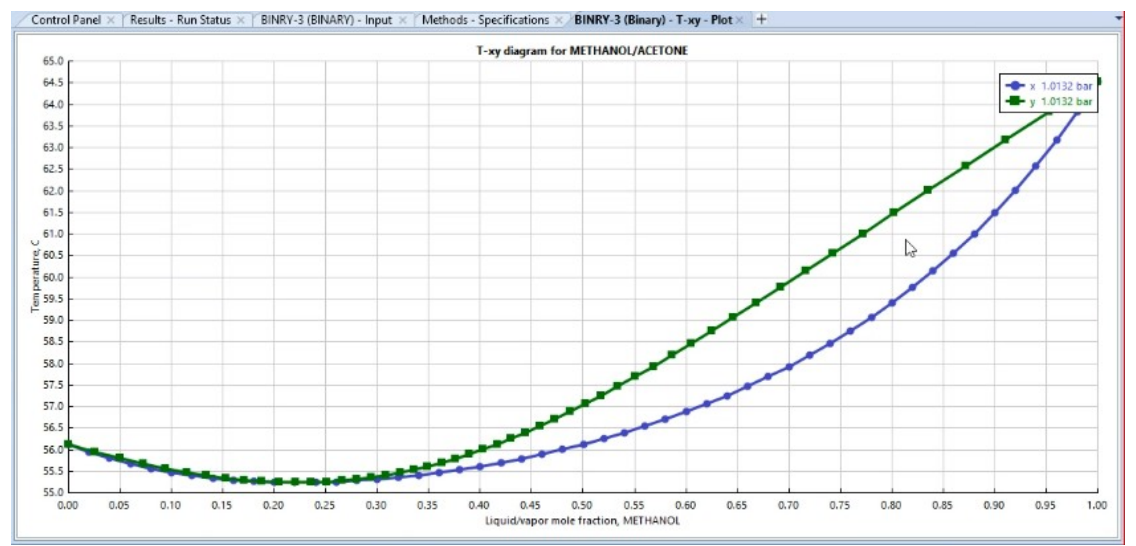


Figura 5 Formación del azeótropo en Metanol-Acetona. Fuente: Elaboración Propia (2021).

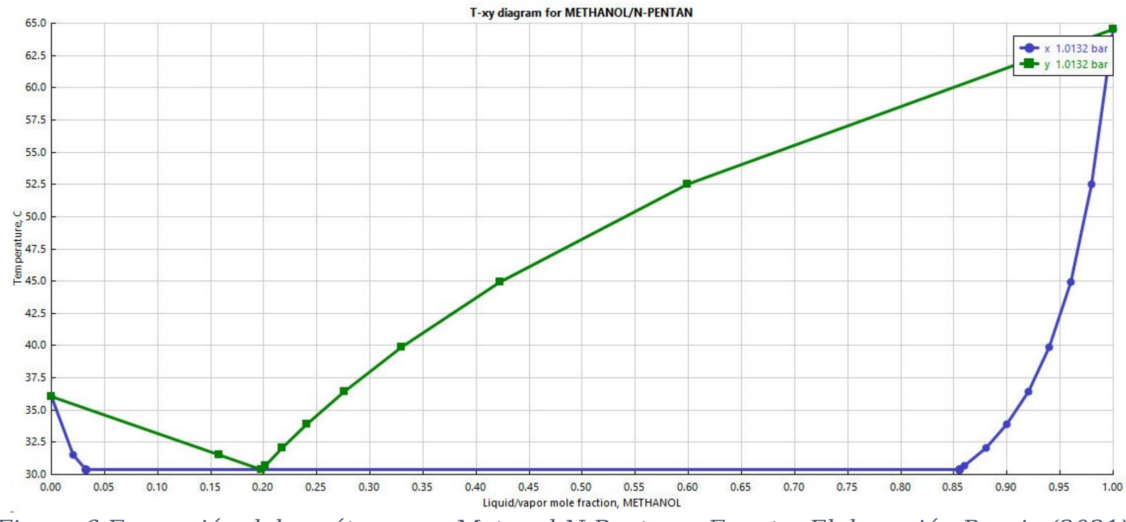


Figura 6 Formación del azeótropo en Metanol-N-Pentano. Fuente: Elaboración Propia (2021).

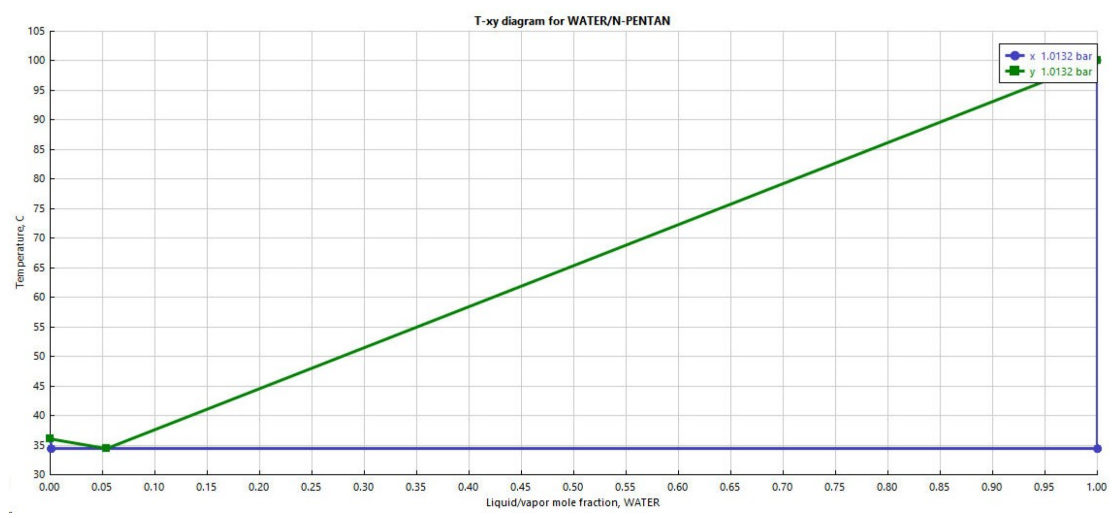
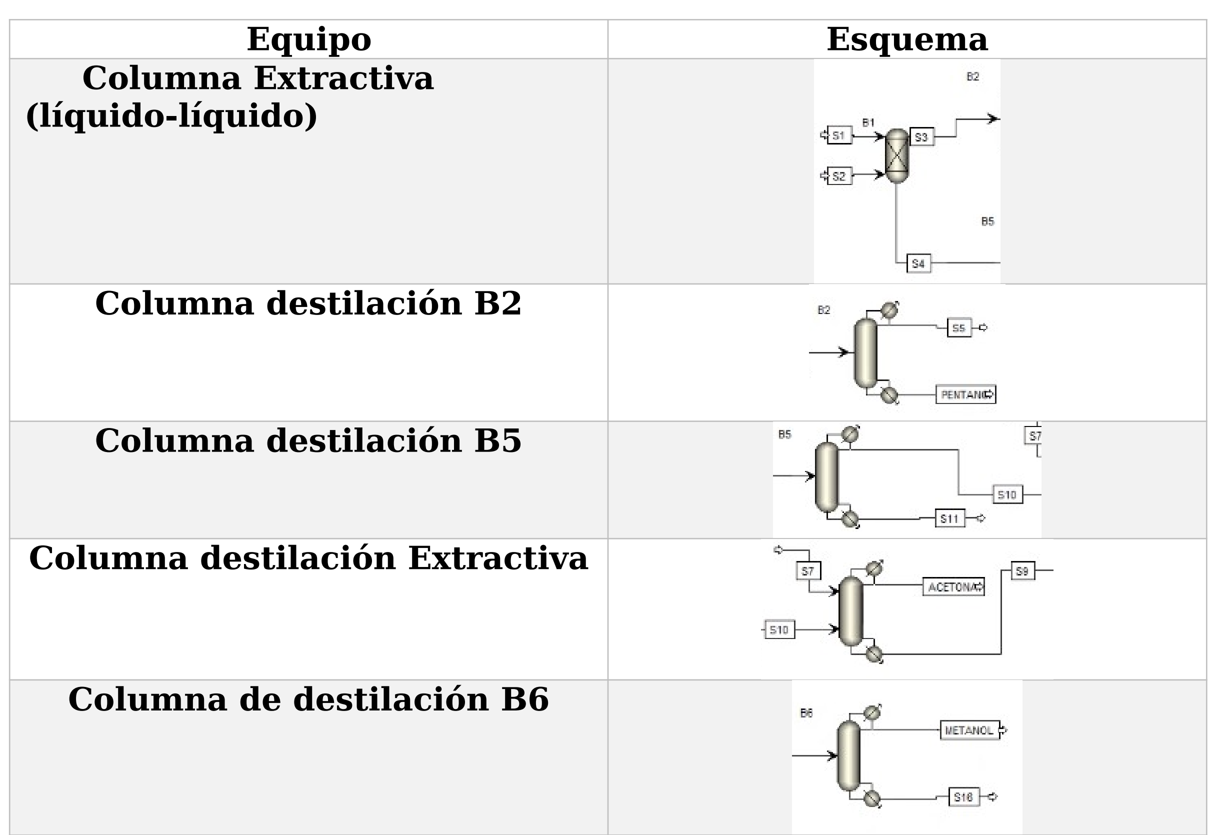


Figura 7 Formación del azeótropo en Agua-N-Pentano. Fuente: Elaboración Propia (2021).

Lista de equipos para el proceso

Tabla 6 Equipamento



Equipo	Esquema
Columna Extractiva (líquido-líquido)	B2, B1, S1, S2, S3, B5, S4
Columna destilación B2	B2, S5, PENTANO
Columna destilación B5	B5, S7, S10, S11
Columna destilación Extractiva	S7, ACETONA, S9, S10
Columna de destilación B6	B6, METANOL, S16

Fuente: Elaboración Propia (2021).

Costos

Para los costos se utilizaron los siguientes datos que se nos fueron otorgados:

- Energy prices:
  - electricity 41 EUR/MWh
  - steam (saturated, 10 bar abs.) 17 EUR/ton
  - cooling water 0,04 EUR/m³ at 20 °C.
  - The plant is expected to operate 8000 h/yr.

Costos anuales				
Equipo	**Costo de equipo ($)**	**Costo de servicios ($)**	**Costo de solvente ($)**	**Costo total**
Columna extractiva (líq-líq)	$ 12,697.98	-	$ 23.34	$ 12,721.32
Columna Destilación B2	$ 272,332.52	$ 16,199.87	-	$ 288,532.38
Columna Destilación B5	$ 256,535.93	$ 28,785.69	-	$ 285,321.63
Columna destilación extractiva	$ 86,609.22	-	$ 30.68	$ 86,639.9
Columna Destilación B4	$ 207,174.95	$ 58,371.53	-	$ 265,546.48

Especificaciones del equipo

Tabla 7 Especificaciones del equipamento

Equipo	Especificaciones
Columna Extractiva (líquido-líquido)	8 Etapas/ /T=25°C/P=1 atm
Columna destilación B2	20 Etapas/Diámetro Plato 0.3644m/ T=32°C/P=1 atm Plato entrada 10/ Carga Reboiler 132.25 kW
Columna destilación B5	11 Etapas/0.3443m/ T=29.2°C/ P=1 atm/Plato entrada 6 Carga Reboiler 235.21 kW
Columna destilación Extractiva	45 Etapas/ 0.4419m/ T=44.52°C/P=1 atm/ Plato entrada: Solvente en 3 y Corrientes en 21 Carga Reboiler 316.87 kW
Columna de destilación B6	12 Etapas/0.4794m/ T=76°C/P=1 atm/ Plato entrada: 8 Carga Reboiler 476.89 kW

Fuente: Elaboración Propia (2021).

Resumen de alternativas consideradas

Otra de nuestras alternativas de solución fueron los diversos sistemas que consideramos:

1) La utilización de procesos de separación mecánica para posteriormente combinarla con métodos de separación por equilibrio químico.
Buscamos realizar la separación de una fase acuosa y fase orgánica a través de un decantador para posteriormente realizar una destilación convencional a la corriente de orgánicos lograr así extraer el n-pentano y con una destilación extractiva separar el azeótropo compuesto por acetona-metanol. Dicha solución no se logró llevar a cabo debido a que la corriente acuosa arrastraba grandes cantidades de orgánicos cuando se colocó el sistema de separación mecánica.

2) Después de realizar el análisis de las volatilidades para cada uno de los compuestos a trabajar, observamos que se pueden realizar las separaciones por destilación convencional. Pero al tratar de realizarlo por una destilación convencional y lograr separar en 2 mezclas metanol/acetona y agua/n-pentano y separar dichas mezclas por medio de destilaciones extractivas descubrimos que esta metodología tampoco se pudo realizar debido a que Aspen® nos indicaba que la columna inicial se tenía menos de 1 etapa debido a que era muy fácil separar dichos componentes, ya que se encontraban muy alejados uno de otro es decir uno era muy ligero y el otro muy pesado es por eso que proseguimos

Discusión

Otros de las alternativas consideradas para la resolución del problema fue la utilización de diversos solventes para realizar las extracciones, principalmente la del sistema de la columna de destilación extractiva, entre las opciones consideradas tenemos los n-alcanos (n-decano, n-undecano y n-dodecano) compuestos que fueron descartados a falta de información de sus propiedades en la literatura.
Otro de los agentes considerado fue el 1-Ethyl-3-methylimidazolium trifluoromethanesulfonate el cual fue descartado también debido a que Aspen® no tenía todos sus parámetros en la base de datos además de que al tratarse de un compuesto iónico podía generar más problemáticas en la simulación del proceso y hasta causar el cambio de modelo termodinámico.
La principal razón por la cual se decidió la utilización de agua como nuestro agente extractante fue a que es muy económica, debido a que la mezcla inicial también contenía este componente ya está considerada su interacción en el modelo termodinámico seleccionado y por último es un compuesto que hace el proceso verde.

Análisis económico

De acuerdo a los costos anteriormente calculados, se percató de que el usar agua como un solvente, ayuda a tener un ahorro económico significativo, a comparación de otros solventes con algunas propiedades con mucha más selectividad o específicas.

Para este tren de simulaciones el costo total anual (servicios +equipos +solventes) es de $938,761.71, lo cual nos indica que es un costo bueno de acuerdo con los parámetros establecidos para la simulación.

Discusión general

Realizando un análisis exhaustivo sobre los posibles cortes de las mezclas y resolver las problemáticas que se presentaban al intentar separarlas, se tuvo que ver las volatilidades, propiedades y parámetros brindados por Aspen para la elección del modelo termodinámico (NRTL).
Una vez realizado lo anterior, se inició la simulación de las mezclas cuando presentaban comportamiento azeotrópico entre el metanol y la acetona, así mismo, se investigó sobre los posibles agentes extractantes para conseguir la separación.
Además, se tuvo que considerar las purezas que debíamos conseguir en cada columna de destilación, ya fuese extractiva o convencional. Al mismo tiempo, se presentaron incalculables errores de convergencia en el software. Se intentó modificar los reflujos, las cargas térmicas, las velocidades del destilado, etc., sin conseguir aumentos significativos.

Como soluciones a estas problemáticas, encontramos que se puede utilizar una columna de extracción al iniciar el proceso de separación, puesto que podríamos obtener directamente una gran cantidad del n-pentano (cerca del 92%), evitando así posteriores problemas. El agente extractante es el agua, por lo que se añade una cantidad suficiente. La parte extraída se introdujo en una columna convencional y se obtuvo la pureza requerida de n-pentano.
Por otra parte, encontramos que para el azeótropo metanol-acetona puede utilizarse nuevamente agua como extractante; por lo tanto, los fondos del extractor líq-líq se llevaron a una columna convencional y posteriormente, a la columna extractiva para conseguir romper el azeótropo y obtener en el domo la acetona y por la parte de los fondos, una mezcla de metanol y agua, que finalmente se puede separar con alta pureza en otra columna convencional.

Informe de Aspen Plus V11

Termodinámica

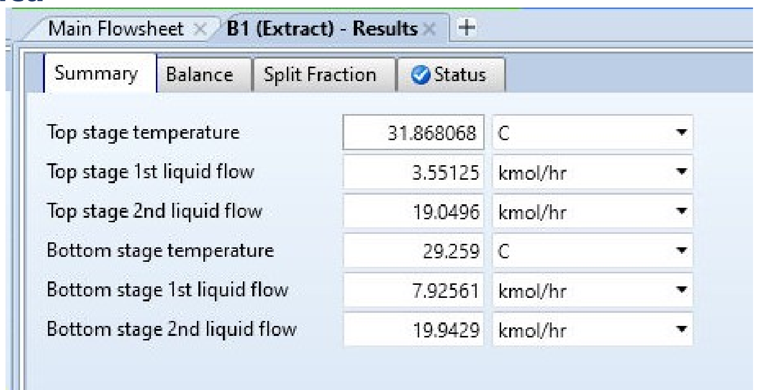


Figura 8 Datos termodinámicos de columna B1, (extracción líquido-líquido)

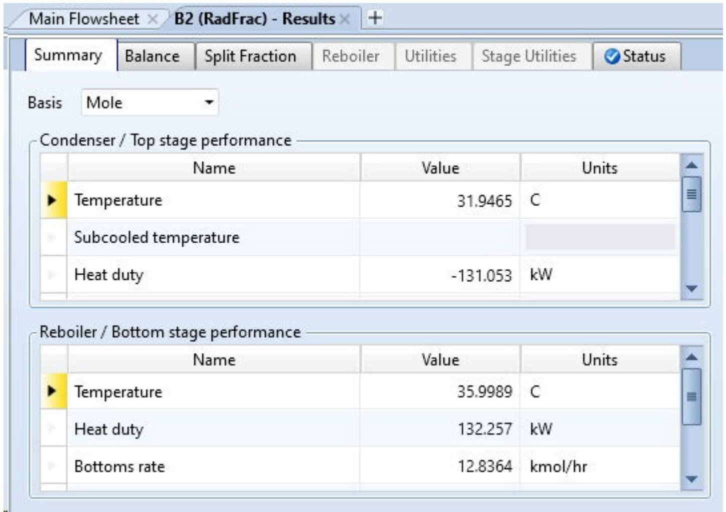


Figura 9 Datos termodinámicos de columna B2, (separación de pentano).

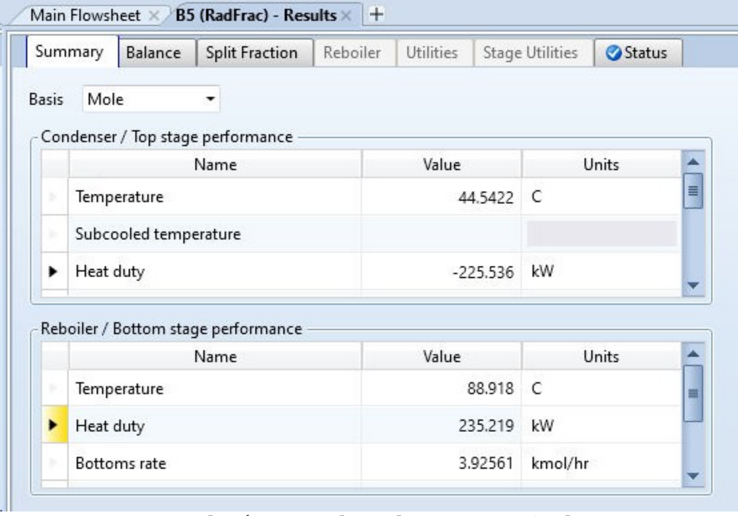


Figura 10 Datos termodinámicos de columna B5, (columna convencional).

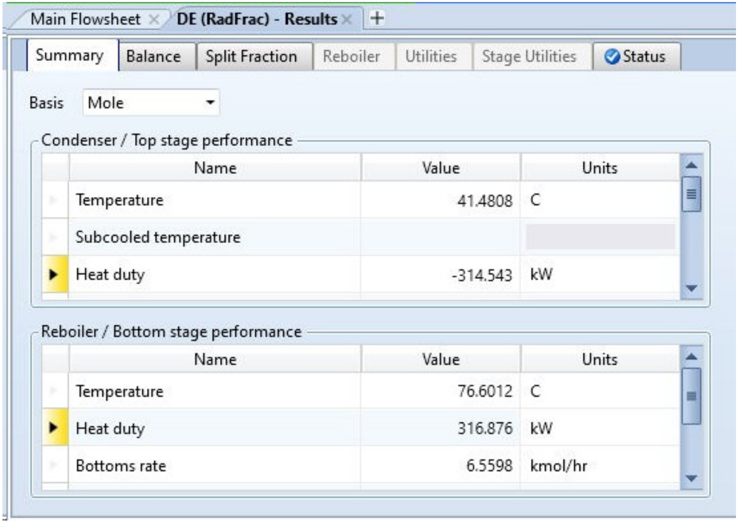
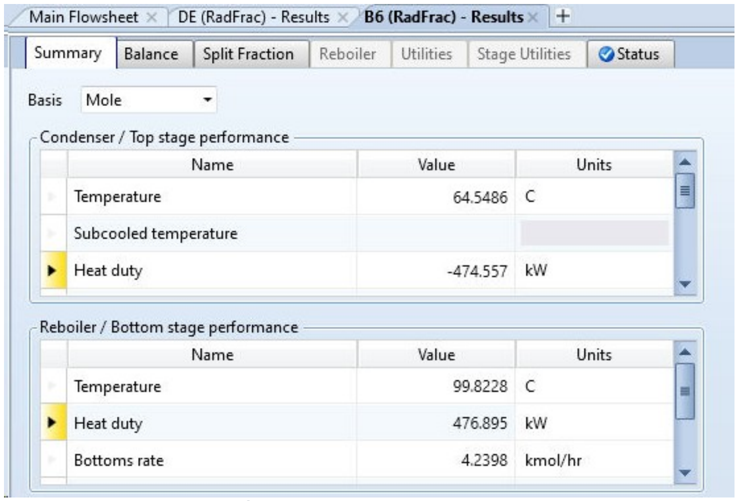


Figura 11 Datos termodinámicos de columna DE, (columna extractiva).

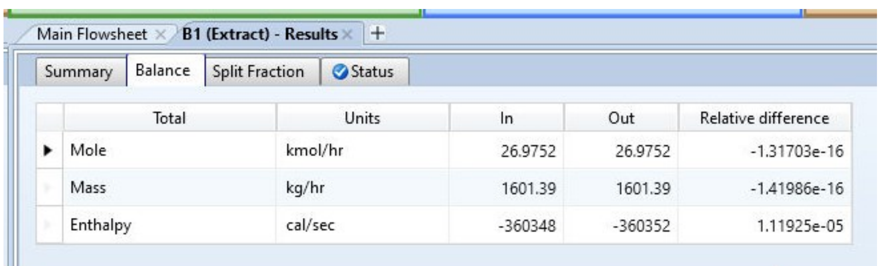


Name	Value	Units
Temperature	64.5486	C
Subcooled temperature		
Heat duty	-474.557	kW

Name	Value	Units
Temperature	99.8228	C
Heat duty	476.895	kW
Bottoms rate	4.2398	kmol/hr

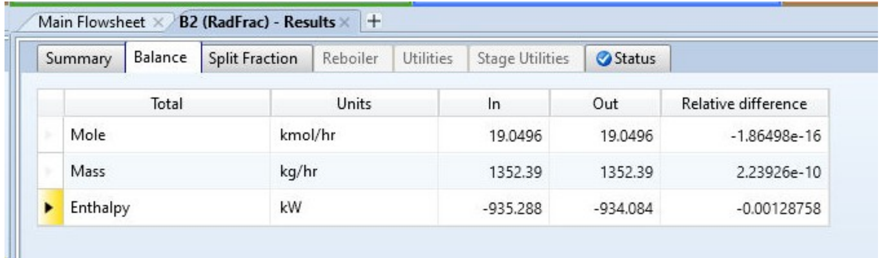
Figura 12 Datos termodinámicos de columna B6, (columna convencional).

Balance general de los materiales del equipo



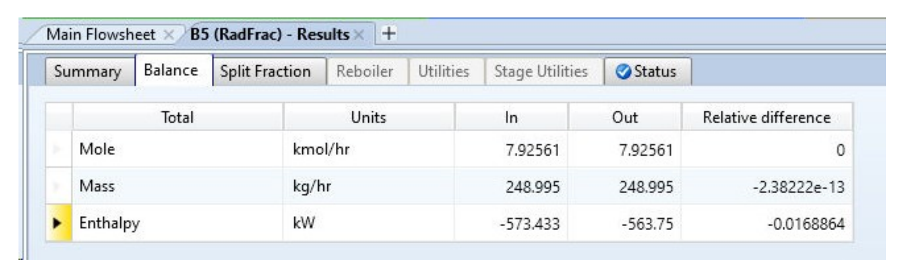
Total	Units	In	Out	Relative difference
Mole	kmol/hr	26.9752	26.9752	-1.31703e-16
Mass	kg/hr	1601.39	1601.39	-1.41986e-16
Enthalpy	cal/sec	-360348	-360352	1.11925e-05

Figura 13 Datos del balance de columna B1, (extracción líquido-líquido).



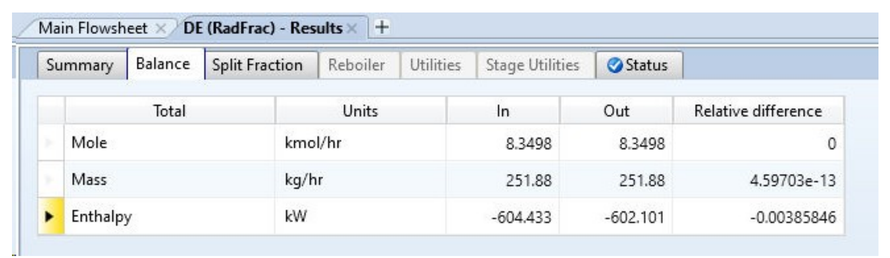
Total	Units	In	Out	Relative difference
Mole	kmol/hr	19.0496	19.0496	-1.86498e-16
Mass	kg/hr	1352.39	1352.39	2.23926e-10
Enthalpy	kW	-935.288	-934.084	-0.00128758

Figura 14 Datos del balance de columna B2, (separación de pentano).



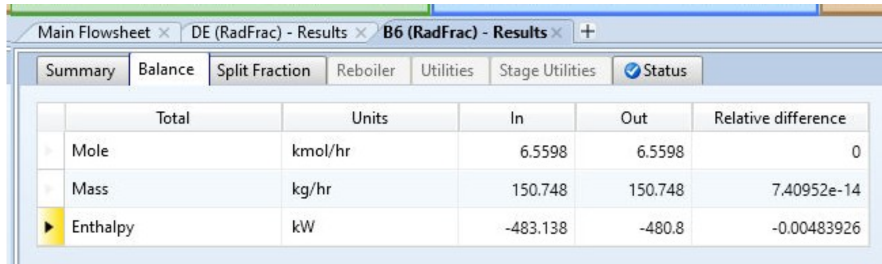
Total	Units	In	Out	Relative difference
Mole	kmol/hr	7.92561	7.92561	0
Mass	kg/hr	248.995	248.995	-2.38222e-13
Enthalpy	kW	-573.433	-563.75	-0.0168864

Figura 15 Datos del balance de columna B5, (columna convencional).



Total	Units	In	Out	Relative difference
Mole	kmol/hr	8.3498	8.3498	0
Mass	kg/hr	251.88	251.88	4.59703e-13
Enthalpy	kW	-604.433	-602.101	-0.00385846

Figura 16 Datos del balance de columna DE, (columna extractiva).



Total	Units	In	Out	Relative difference
Mole	kmol/hr	6.5598	6.5598	0
Mass	kg/hr	150.748	150.748	7.40952e-14
Enthalpy	kW	-483.138	-480.8	-0.00483926

Figura 17 Datos del balance de columna B6, (columna convencional).

Corrientes

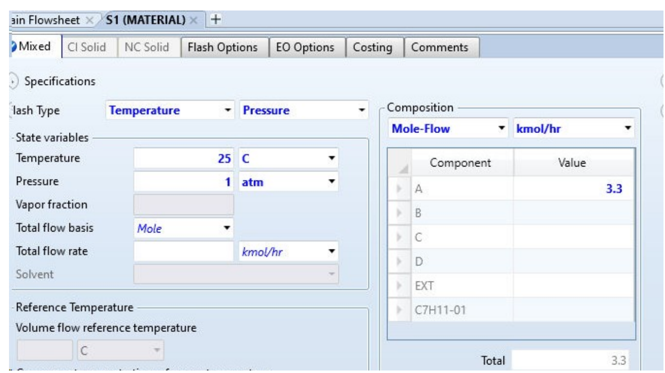


Figura 18 Datos de corriente S1.

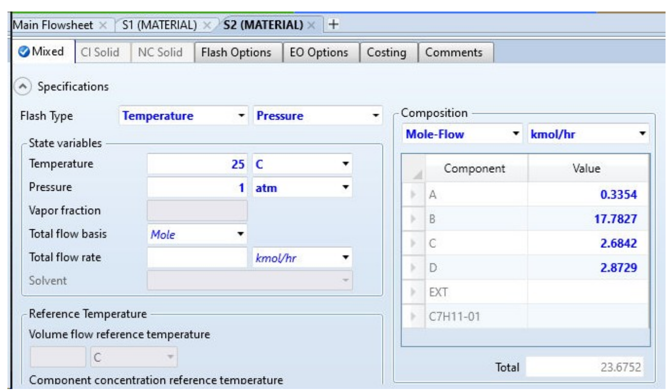


Figura 19 Datos de corriente S2.

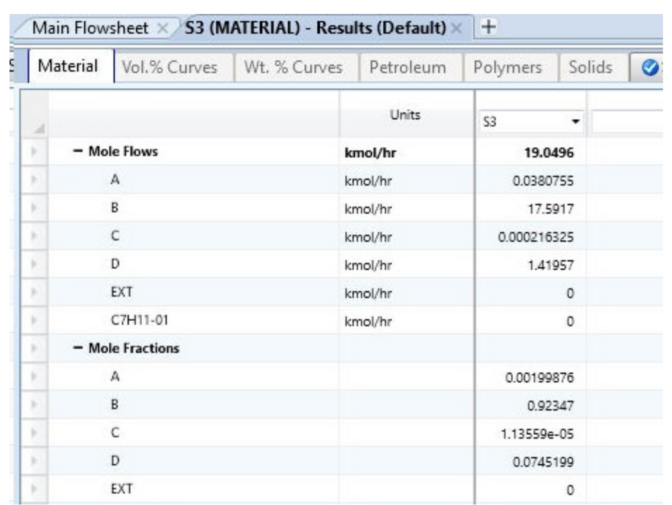
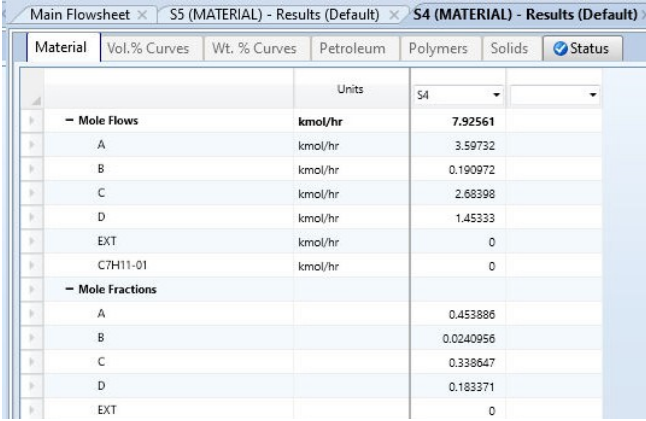
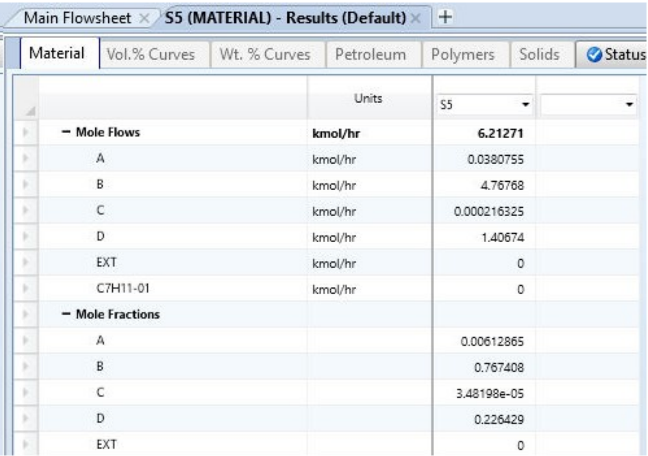


Figura 20 Datos de corriente S3.



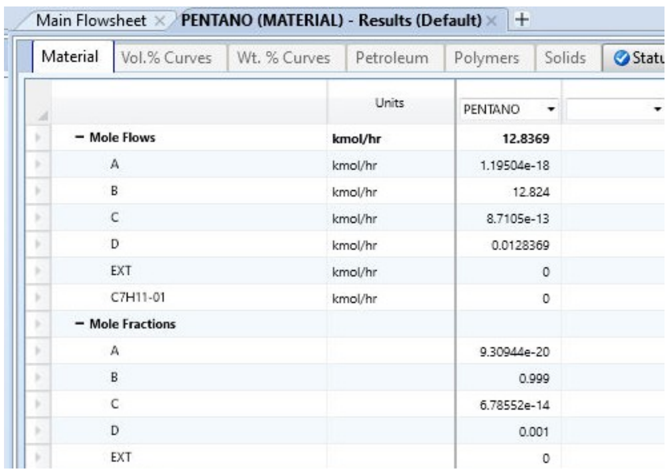
	Units	S4
− Mole Flows	kmol/hr	7.92561
A	kmol/hr	3.59732
B	kmol/hr	0.190972
C	kmol/hr	2.68398
D	kmol/hr	1.45333
EXT	kmol/hr	0
C7H11-01	kmol/hr	0
− Mole Fractions		
A		0.453886
B		0.0240956
C		0.338647
D		0.183371
EXT		0

Figura 21 Datos corriente S4.



	Units	S5
− Mole Flows	kmol/hr	6.21271
A	kmol/hr	0.0380755
B	kmol/hr	4.76768
C	kmol/hr	0.000216325
D	kmol/hr	1.40674
EXT	kmol/hr	0
C7H11-01	kmol/hr	0
− Mole Fractions		
A		0.00612865
B		0.767408
C		3.48198e-05
D		0.226429
EXT		0

Figura 22 Datos corriente S5.



	Units	PENTANO
− Mole Flows	kmol/hr	12.8369
A	kmol/hr	1.19504e-18
B	kmol/hr	12.824
C	kmol/hr	8.7105e-13
D	kmol/hr	0.0128369
EXT	kmol/hr	0
C7H11-01	kmol/hr	0
− Mole Fractions		
A		9.30944e-20
B		0.999
C		6.78552e-14
D		0.001
EXT		0

Figura 23 Datos corriente PENTANO.

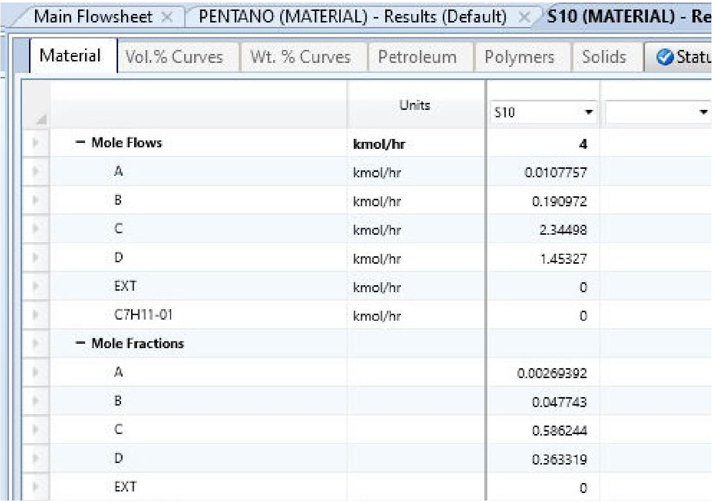


Figura 24 Datos corriente S10.

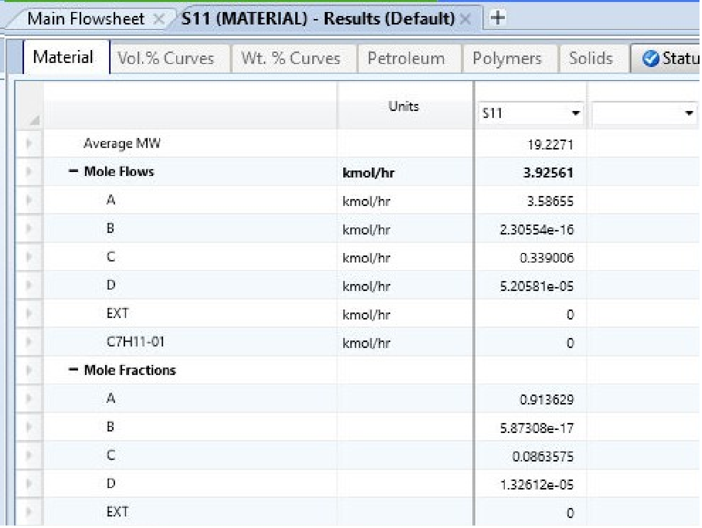


Figura 25 Datos corriente S11

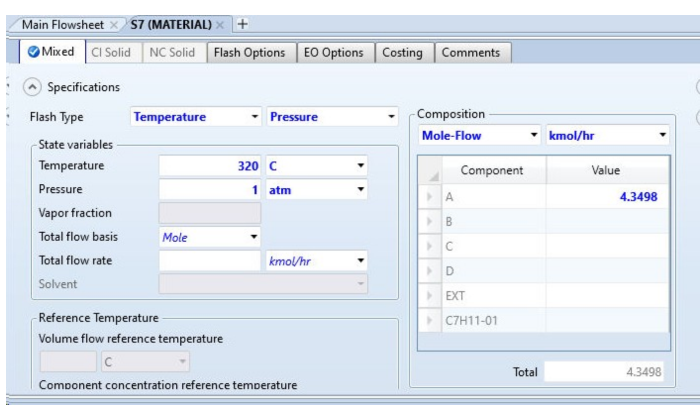
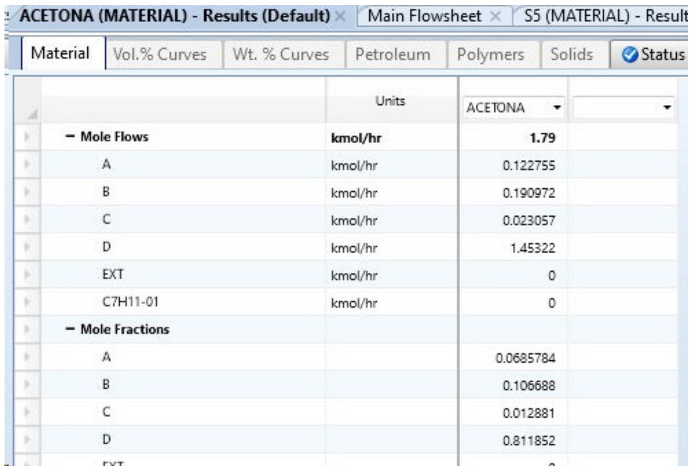
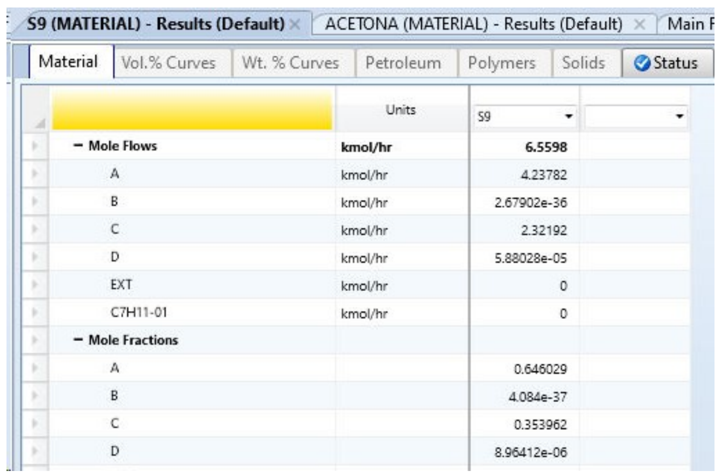


Figura 26 Datos corriente S7.



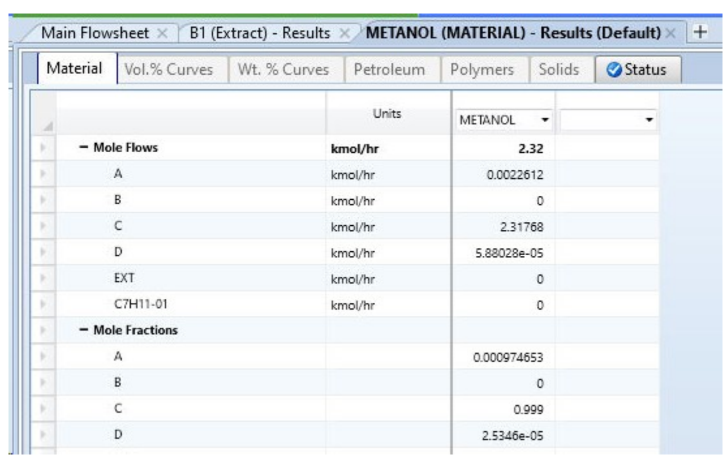
	Units	ACETONA
− Mole Flows	kmol/hr	1.79
A	kmol/hr	0.122755
B	kmol/hr	0.190972
C	kmol/hr	0.023057
D	kmol/hr	1.45322
EXT	kmol/hr	0
C7H11-01	kmol/hr	0
− Mole Fractions		
A		0.0685784
B		0.106688
C		0.012881
D		0.811852

Figura 27 Datos corriente ACETONA.



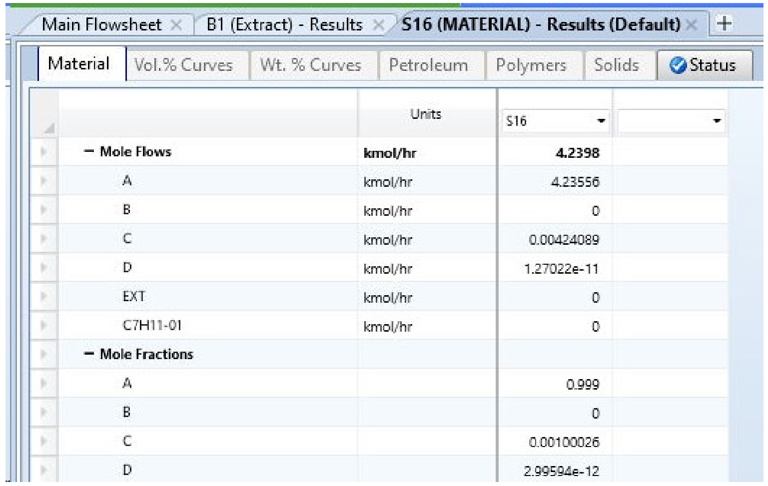
	Units	S9
− Mole Flows	kmol/hr	6.5598
A	kmol/hr	4.23782
B	kmol/hr	2.67902e-36
C	kmol/hr	2.32192
D	kmol/hr	5.88028e-05
EXT	kmol/hr	0
C7H11-01	kmol/hr	0
− Mole Fractions		
A		0.646029
B		4.084e-37
C		0.353962
D		8.96412e-06

Figura 28 Datos corriente S9.



	Units	METANOL
− Mole Flows	kmol/hr	2.32
A	kmol/hr	0.0022612
B	kmol/hr	0
C	kmol/hr	2.31768
D	kmol/hr	5.88028e-05
EXT	kmol/hr	0
C7H11-01	kmol/hr	0
− Mole Fractions		
A		0.000974653
B		0
C		0.999
D		2.5346e-05

Figura 29 Datos corriente METANOL



Main Flowsheet | B1 (Extract) - Results | S16 (MATERIAL) - Results (Default)

Material | Vol.% Curves | Wt. % Curves | Petroleum | Polymers | Solids | Status

	Units	S16
− Mole Flows	kmol/hr	4.2398
A	kmol/hr	4.23556
B	kmol/hr	0
C	kmol/hr	0.00424089
D	kmol/hr	1.27022e-11
EXT	kmol/hr	0
C7H11-01	kmol/hr	0
− Mole Fractions		
A		0.999
B		0
C		0.00100026
D		2.99594e-12

Figura 30 Datos corriente S16.

Resúmenes de equipos

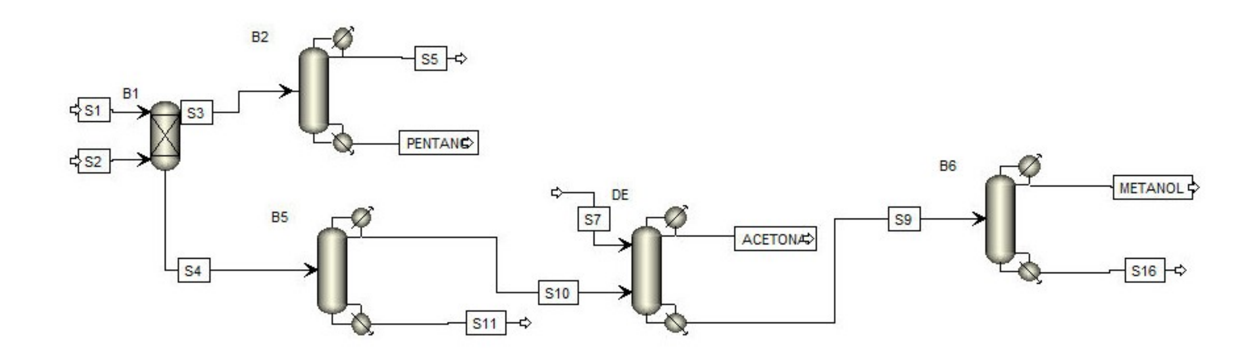
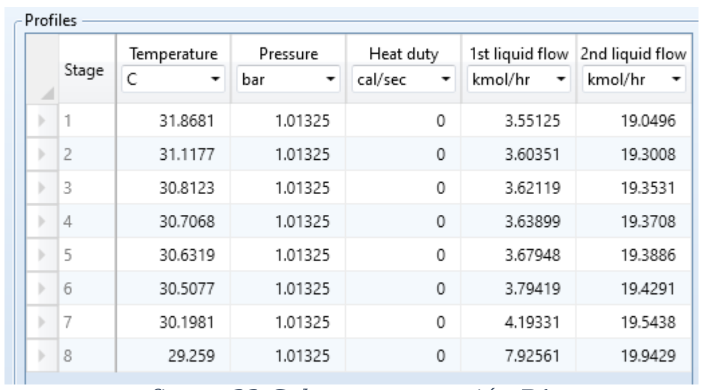


Figura 31 Diagrama del proceso con todos los equipos involucrados.

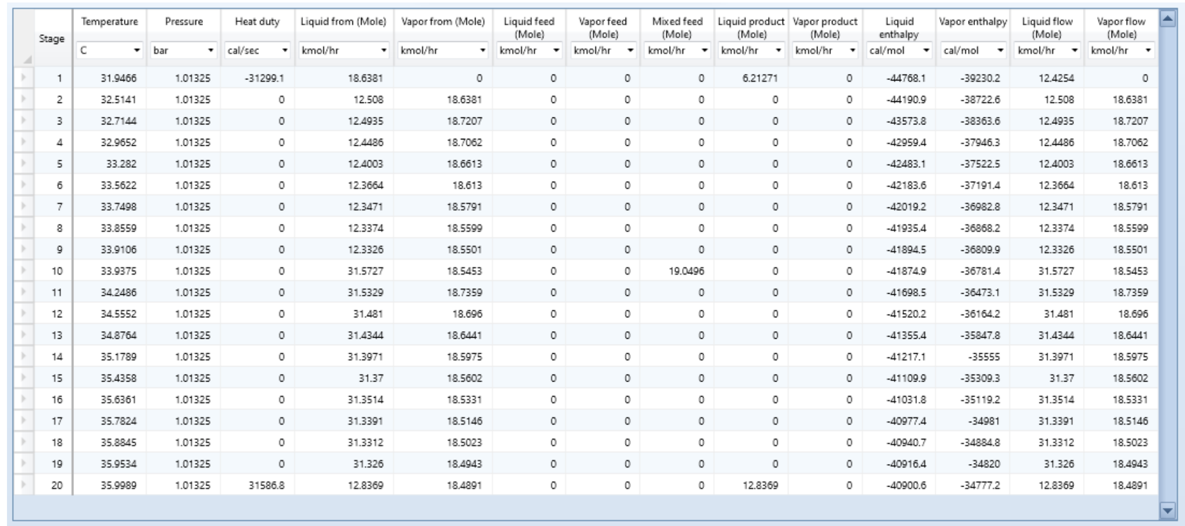
Perfiles de torre



Profiles

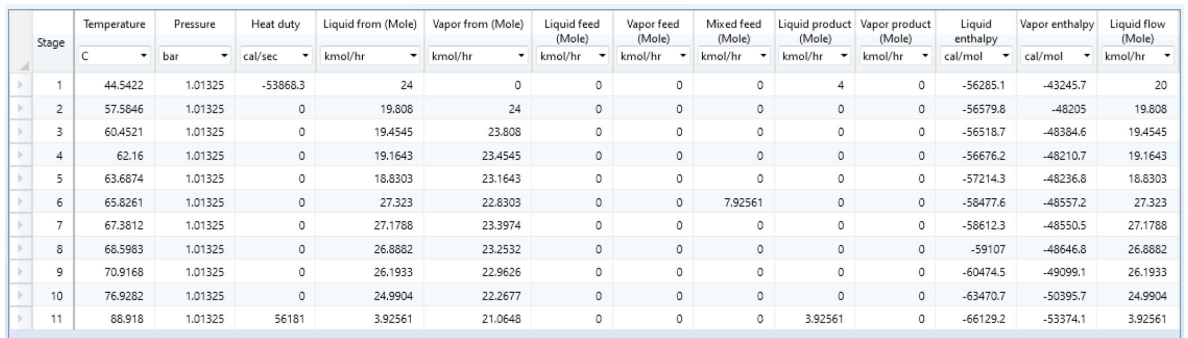
Stage	Temperature C	Pressure bar	Heat duty cal/sec	1st liquid flow kmol/hr	2nd liquid flow kmol/hr
1	31.8681	1.01325	0	3.55125	19.0496
2	31.1177	1.01325	0	3.60351	19.3008
3	30.8123	1.01325	0	3.62119	19.3531
4	30.7068	1.01325	0	3.63899	19.3708
5	30.6319	1.01325	0	3.67948	19.3886
6	30.5077	1.01325	0	3.79419	19.4291
7	30.1981	1.01325	0	4.19331	19.5438
8	29.259	1.01325	0	7.92561	19.9429

figura 32 Columna extracción B1.



Stage	Temperature	Pressure	Heat duty	Liquid from (Mole)	Vapor from (Mole)	Liquid feed (Mole)	Vapor feed (Mole)	Mixed feed (Mole)	Liquid product (Mole)	Vapor product (Mole)	Liquid enthalpy	Vapor enthalpy	Liquid flow (Mole)	Vapor flow (Mole)
	C	bar	cal/sec	kmol/hr	kmol/hr	kmol/hr	kmol/hr	kmol/hr	kmol/hr	kmol/hr	cal/mol	cal/mol	kmol/hr	kmol/hr
1	31.9466	1.01325	-31299.1	18.6381	0	0	0	0	6.21271	0	-44768.1	-39230.2	12.4254	0
2	32.5141	1.01325	0	12.508	18.6381	0	0	0	0	0	-44190.9	-38722.6	12.508	18.6381
3	32.7144	1.01325	0	12.4935	18.7207	0	0	0	0	0	-43573.8	-38363.6	12.4935	18.7207
4	32.9652	1.01325	0	12.4486	18.7062	0	0	0	0	0	-42959.4	-37946.3	12.4486	18.7062
5	33.282	1.01325	0	12.4003	18.6613	0	0	0	0	0	-42483.1	-37522.5	12.4003	18.6613
6	33.5622	1.01325	0	12.3664	18.613	0	0	0	0	0	-42183.6	-37191.4	12.3664	18.613
7	33.7498	1.01325	0	12.3471	18.5791	0	0	0	0	0	-42019.2	-36982.8	12.3471	18.5791
8	33.8559	1.01325	0	12.3374	18.5599	0	0	0	0	0	-41935.4	-36868.2	12.3374	18.5599
9	33.9106	1.01325	0	12.3326	18.5501	0	0	0	0	0	-41894.5	-36809.9	12.3326	18.5501
10	33.9375	1.01325	0	31.5727	18.5453	0	0	19.0496	0	0	-41874.9	-36781.4	31.5727	18.5453
11	34.2486	1.01325	0	31.5329	18.7359	0	0	0	0	0	-41698.5	-36473.1	31.5329	18.7359
12	34.5552	1.01325	0	31.481	18.696	0	0	0	0	0	-41520.2	-36164.2	31.481	18.696
13	34.8764	1.01325	0	31.4344	18.6441	0	0	0	0	0	-41355.4	-35847.8	31.4344	18.6441
14	35.1789	1.01325	0	31.3971	18.5975	0	0	0	0	0	-41217.1	-35555	31.3971	18.5975
15	35.4358	1.01325	0	31.37	18.5602	0	0	0	0	0	-41109.9	-35309.3	31.37	18.5602
16	35.6361	1.01325	0	31.3514	18.5331	0	0	0	0	0	-41031.8	-35119.2	31.3514	18.5331
17	35.7824	1.01325	0	31.3391	18.5146	0	0	0	0	0	-40977.4	-34981	31.3391	18.5146
18	35.8845	1.01325	0	31.3312	18.5023	0	0	0	0	0	-40940.7	-34884.8	31.3312	18.5023
19	35.9534	1.01325	0	31.326	18.4943	0	0	0	0	0	-40916.4	-34820	31.326	18.4943
20	35.9989	1.01325	31586.8	12.8369	18.4891	0	0	0	12.8369	0	-40900.6	-34777.2	12.8369	18.4891

figura 33 Columna convencional B2.

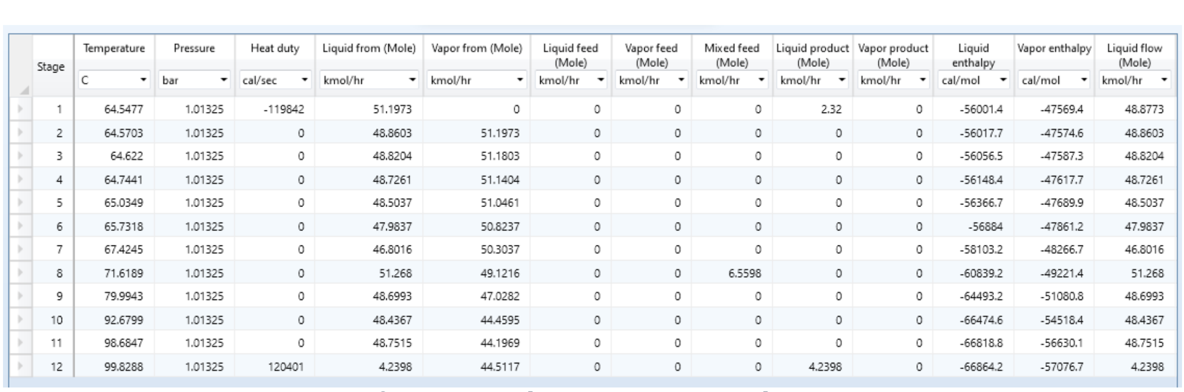


Stage	Temperature	Pressure	Heat duty	Liquid from (Mole)	Vapor from (Mole)	Liquid feed (Mole)	Vapor feed (Mole)	Mixed feed (Mole)	Liquid product (Mole)	Vapor product (Mole)	Liquid enthalpy	Vapor enthalpy	Liquid flow (Mole)
	C	bar	cal/sec	kmol/hr	kmol/hr	kmol/hr	kmol/hr	kmol/hr	kmol/hr	kmol/hr	cal/mol	cal/mol	kmol/hr
1	44.5422	1.01325	-53868.3	24	0	0	0	0	4	0	-56285.1	-43245.7	20
2	57.5846	1.01325	0	19.808	24	0	0	0	0	0	-56579.8	-48205	19.808
3	60.4521	1.01325	0	19.4545	23.808	0	0	0	0	0	-56518.7	-48384.6	19.4545
4	62.16	1.01325	0	19.1643	23.4545	0	0	0	0	0	-56676.2	-48210.7	19.1643
5	63.6874	1.01325	0	18.8303	23.1643	0	0	0	0	0	-57214.3	-48236.8	18.8303
6	65.8261	1.01325	0	27.323	22.8303	0	0	7.92561	0	0	-58477.6	-48557.2	27.323
7	67.3812	1.01325	0	27.1788	23.3974	0	0	0	0	0	-58612.3	-48550.5	27.1788
8	68.5983	1.01325	0	26.8882	23.2532	0	0	0	0	0	-59107	-48646.8	26.8882
9	70.9168	1.01325	0	26.1933	22.9626	0	0	0	0	0	-60474.5	-49099.1	26.1933
10	76.9282	1.01325	0	24.9904	22.2677	0	0	0	0	0	-63470.7	-50395.7	24.9904
11	88.918	1.01325	56181	3.92561	21.0648	0	0	0	3.92561	0	-66129.2	-53374.1	3.92561

figura 34 Columna convencional B5.

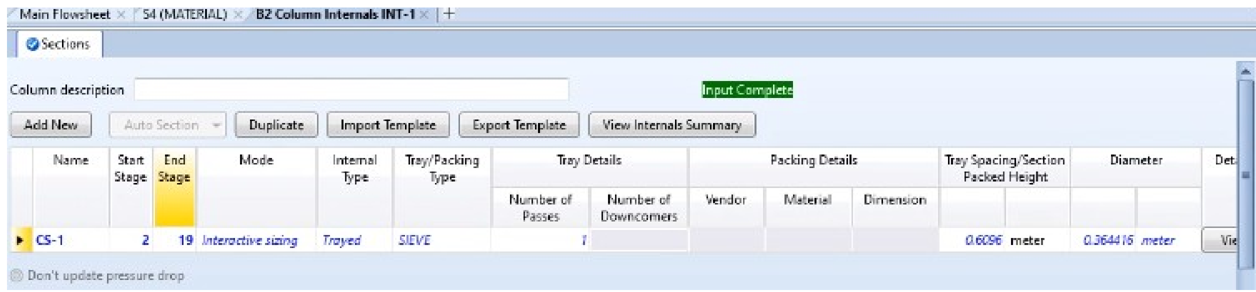
Stage	Temperature C	Pressure bar	Heat duty cal/sec	Liquid from (Mole) kmol/hr	Vapor from (Mole) kmol/hr	Liquid feed (Mole) kmol/hr	Vapor feed (Mole) kmol/hr	Mixed feed (Mole) kmol/hr	Liquid product (Mole) kmol/hr	Vapor product (Mole) kmol/hr	Liquid enthalpy cal/mol	Vapor enthalpy cal/mol	Liquid flow (Mole) kmol/hr	Vapor flow (Mole) kmol/hr
1	41.4811	1.01325	-75125	35.8	0	0	0	0	1.79	0	-57144.3	-63330.4	34.01	0
2	53.8412	1.01325	0	32.9627	35.8	0	0	0	0	0	-59213.6	-49509.0	32.9627	35.8
3	56.8498	1.01325	0	36.6548	34.7527	0	0	6.3498	0	0	-60534.1	-51324.9	36.6548	34.7527
4	57.0903	1.01325	0	36.6782	34.095	0	0	0	0	0	-60530.6	-51488.3	36.6782	34.095
5	57.1037	1.01325	0	36.6883	34.1184	0	0	0	0	0	-60517.1	-51490.7	36.6883	34.1184
6	57.0964	1.01325	0	36.6984	34.1285	0	0	0	0	0	-60501.2	-51478.9	36.6984	34.1285
7	57.0909	1.01325	0	36.7095	34.1386	0	0	0	0	0	-60483.2	-51464.4	36.7095	34.1386
8	57.0829	1.01325	0	36.7221	34.1497	0	0	0	0	0	-60462.8	-51448	36.7221	34.1497
9	57.0734	1.01325	0	36.7357	34.1623	0	0	0	0	0	-60439.7	-51429.3	36.7357	34.1623
10	57.063	1.01325	0	36.7509	34.1759	0	0	0	0	0	-60413.3	-51408.1	36.7509	34.1759
11	57.0516	1.01325	0	36.7678	34.1911	0	0	0	0	0	-60383.2	-51383.8	36.7678	34.1911
12	57.039	1.01325	0	36.7868	34.208	0	0	0	0	0	-60348.4	-51355.9	36.7868	34.208
13	57.0253	1.01325	0	36.8079	34.227	0	0	0	0	0	-60308.2	-51323.5	36.8079	34.227
14	57.0103	1.01325	0	36.8313	34.2481	0	0	0	0	0	-60261.3	-51285.9	36.8313	34.2481
15	56.9943	1.01325	0	36.8572	34.2715	0	0	0	0	0	-60206.2	-51241.6	36.8572	34.2715
16	56.9778	1.01325	0	36.8851	34.2974	0	0	0	0	0	-60140.7	-51189.2	36.8851	34.2974
17	56.9615	1.01325	0	36.9155	34.3253	0	0	0	0	0	-60062	-51126.2	36.9155	34.3253
18	56.9466	1.01325	0	36.9485	34.3557	0	0	0	0	0	-59965.4	-51049.6	36.9485	34.3557
19	56.9335	1.01325	0	36.9892	34.3887	0	0	0	0	0	-59841.5	-50954.4	36.9892	34.3887
20	56.9146	1.01325	0	37.0632	34.4294	0	0	0	0	0	-59667.6	-50832	37.0632	34.4294
21	56.8424	1.01325	0	41.2215	34.5034	0	0	4	0	0	-59378.3	-50664.5	41.2215	34.5034
22	56.977	1.01325	0	41.2326	34.6617	0	0	0	0	0	-59379.7	-50752	41.2326	34.6617
23	56.989	1.01325	0	41.2333	34.6728	0	0	0	0	0	-59376.3	-50756.4	41.2333	34.6728
24	56.9913	1.01325	0	41.2331	34.6735	0	0	0	0	0	-59370.8	-50752.5	41.2331	34.6735
25	56.9937	1.01325	0	41.2323	34.6733	0	0	0	0	0	-59362.6	-50745.9	41.2323	34.6733
26	56.9973	1.01325	0	41.2307	34.6725	0	0	0	0	0	-59350.3	-50735.9	41.2307	34.6725
27	57.0031	1.01325	0	41.2279	34.6709	0	0	0	0	0	-59332.2	-50721	41.2279	34.6709
28	57.0128	1.01325	0	41.2226	34.6681	0	0	0	0	0	-59305.3	-50698.8	41.2226	34.6681
29	57.0298	1.01325	0	41.2112	34.6628	0	0	0	0	0	-59265.6	-50665.6	41.2112	34.6628
30	57.0618	1.01325	0	41.1885	34.6514	0	0	0	0	0	-59207.4	-50615.7	41.1885	34.6514
31	57.125	1.01325	0	41.1408	34.6287	0	0	0	0	0	-59123.4	-50541	41.1408	34.6287
32	57.2583	1.01325	0	41.0293	34.581	0	0	0	0	0	-59005	-50428.7	41.0293	34.581
33	57.5531	1.01325	0	40.7927	34.4695	0	0	0	0	0	-58844.6	-50260.2	40.7927	34.4695
34	58.2149	1.01325	0	40.3427	34.2329	0	0	0	0	0	-58641.4	-50009.2	40.3427	34.2329
35	59.5814	1.01325	0	39.6962	33.7829	0	0	0	0	0	-58412.5	-49650	39.6962	33.7829
36	61.7203	1.01325	0	39.0722	33.1364	0	0	0	0	0	-58201.3	-49198.1	39.0722	33.1364
37	64.057	1.01325	0	38.6072	32.5124	0	0	0	0	0	-58050.8	-48767.6	38.6072	32.5124
38	65.6598	1.01325	0	38.5109	32.1274	0	0	0	0	0	-57967.8	-48472.9	38.5109	32.1274
39	66.5052	1.01325	0	38.4351	31.9511	0	0	0	0	0	-57934.2	-48319.9	38.4351	31.9511
40	66.9092	1.01325	0	38.3916	31.8753	0	0	0	0	0	-57937.2	-48256.6	38.3916	31.8753
41	67.1501	1.01325	0	38.3349	31.8318	0	0	0	0	0	-57989.2	-48246.9	38.3349	31.8318
42	67.4582	1.01325	0	38.1984	31.7751	0	0	0	0	0	-58158.1	-48292.4	38.1984	31.7751
43	68.1968	1.01325	0	37.8214	31.6386	0	0	0	0	0	-58653.1	-48454.5	37.8214	31.6386
44	70.3298	1.01325	0	36.019	31.2616	0	0	0	0	0	-60051.4	-48936.3	36.019	31.2616
45	76.6008	1.01325	75858.2	6.5598	30.2592	0	0	0	6.5598	0	-63129	-50915.9	6.5598	30.2592

figura 35 Columna destilación extractiva DE.



Stage	Temperature C	Pressure bar	Heat duty cal/sec	Liquid from (Mole) kmol/hr	Vapor from (Mole) kmol/hr	Liquid feed (Mole) kmol/hr	Vapor feed (Mole) kmol/hr	Mixed feed (Mole) kmol/hr	Liquid product (Mole) kmol/hr	Vapor product (Mole) kmol/hr	Liquid enthalpy cal/mol	Vapor enthalpy cal/mol	Liquid flow (Mole) kmol/hr
1	64.5477	1.01325	-119842	51.1973	0	0	0	0	2.32	0	-56001.4	-47569.4	48.8773
2	64.5703	1.01325	0	48.8603	51.1973	0	0	0	0	0	-56017.7	-47574.6	48.8603
3	64.622	1.01325	0	48.8204	51.1803	0	0	0	0	0	-56056.5	-47587.3	48.8204
4	64.7441	1.01325	0	48.7261	51.1404	0	0	0	0	0	-56148.4	-47617.7	48.7261
5	65.0349	1.01325	0	48.5037	51.0461	0	0	0	0	0	-56366.7	-47689.9	48.5037
6	65.7318	1.01325	0	47.9837	50.8237	0	0	0	0	0	-56884	-47861.2	47.9837
7	67.4245	1.01325	0	46.8016	50.3037	0	0	0	0	0	-58103.2	-48266.7	46.8016
8	71.6189	1.01325	0	51.268	49.1216	0	0	6.5598	0	0	-60839.2	-49221.4	51.268
9	79.9943	1.01325	0	48.6993	47.0282	0	0	0	0	0	-64493.2	-51080.8	48.6993
10	92.6799	1.01325	0	48.4367	44.4595	0	0	0	0	0	-66474.6	-54518.4	48.4367
11	98.6847	1.01325	0	48.7515	44.1969	0	0	0	0	0	-66818.8	-56630.1	48.7515
12	99.8288	1.01325	120401	4.2398	44.5117	0	0	0	4.2398	0	-66864.2	-57076.7	4.2398

figura 36 Columna convencional B6.



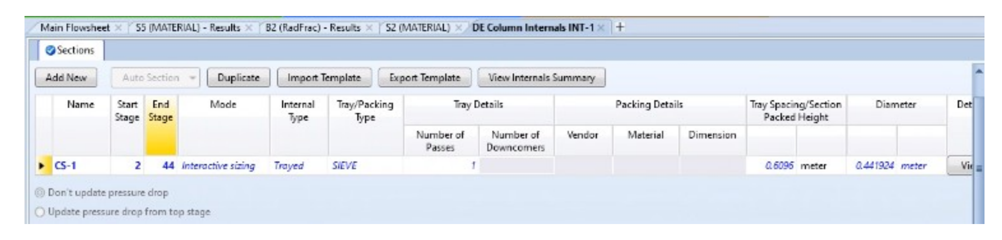
Name	Start Stage	End Stage	Mode	Internal Type	Tray/Packing Type	Tray Details: Number of Passes	Tray Details: Number of Downcomers	Packing Details: Vendor	Packing Details: Material	Packing Details: Dimension	Tray Spacing/Section Packed Height		Diameter	
CS-1	2	19	Interactive sizing	Trayed	SIEVE	1					0.6096	meter	0.364416	meter

Figura 37. Columna convencional B2 (separación del n-pentano)



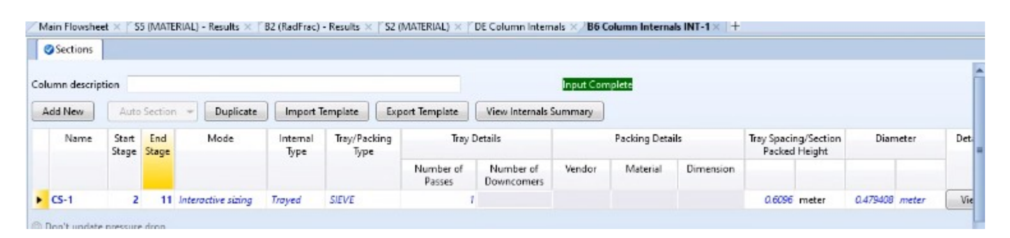
Name	Start Stage	End Stage	Mode	Internal Type	Tray/Packing Type	Tray Details: Number of Passes	Tray Details: Number of Downcomers	Packing Details: Vendor	Packing Details: Material	Packing Details: Dimension	Tray Spacing/Section Packed Height		Diameter	
CS-1	2	10	Interactive sizing	Trayed	SIEVE	1					0.6096	meter	0.344363	meter

Figura 38.Columna convencional B5. (Separación)



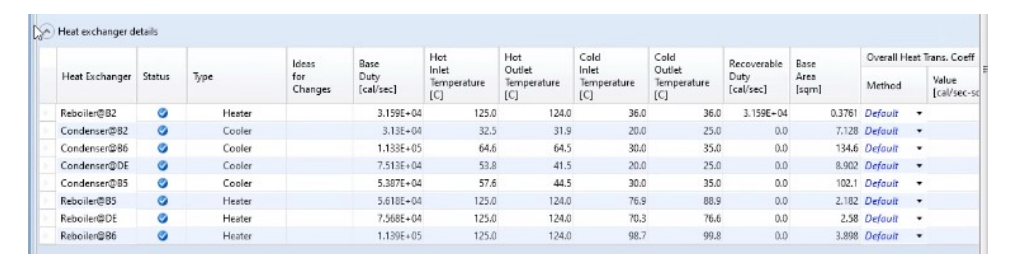
Name	Start Stage	End Stage	Mode	Internal Type	Tray/Packing Type	Tray Details: Number of Passes	Tray Details: Number of Downcomers	Packing Details: Vendor	Packing Details: Material	Packing Details: Dimension	Tray Spacing/Section Packed Height		Diameter	
CS-1	2	44	Interactive sizing	Trayed	SIEVE	1					0.6096	meter	0.441924	meter

Figura 39. Columna destilación extractiva (DE) (acetona-metanol y agua)



Name	Start Stage	End Stage	Mode	Internal Type	Tray/Packing Type	Tray Details: Number of Passes	Tray Details: Number of Downcomers	Packing Details: Vendor	Packing Details: Material	Packing Details: Dimension	Tray Spacing/Section Packed Height		Diameter	
CS-1	2	11	Interactive sizing	Trayed	SIEVE	1					0.6096	meter	0.479408	meter

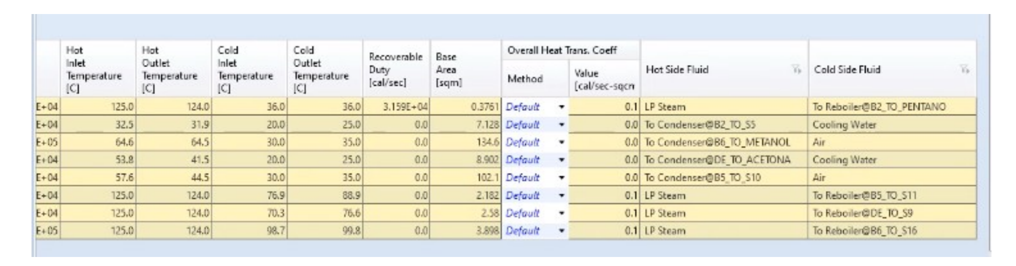
Figura 40. Columna convencional B6 (metanol-agua)



Heat exchanger details

Heat Exchanger	Status	Type	Ideas for Changes	Base Duty [cal/sec]	Hot Inlet Temperature [C]	Hot Outlet Temperature [C]	Cold Inlet Temperature [C]	Cold Outlet Temperature [C]	Recoverable Duty [cal/sec]	Base Area [sqm]	Overall Heat Trans. Coeff Method
Reboiler@B2		Heater		3.159E+04	125.0	124.0	36.0	36.0	3.159E+04	0.3761	Default
Condenser@B2		Cooler		3.13E+04	32.5	31.9	20.0	25.0	0.0	7.128	Default
Condenser@B6		Cooler		1.133E+05	64.6	64.5	30.0	35.0	0.0	134.6	Default
Condenser@DE		Cooler		7.513E+04	53.8	41.5	20.0	25.0	0.0	8.902	Default
Condenser@B5		Cooler		5.387E+04	57.6	44.5	30.0	35.0	0.0	102.1	Default
Reboiler@B5		Heater		5.618E+04	125.0	124.0	76.9	88.9	0.0	2.182	Default
Reboiler@DE		Heater		7.568E+04	125.0	124.0	70.3	76.6	0.0	2.58	Default
Reboiler@B6		Heater		1.139E+05	125.0	124.0	98.7	99.8	0.0	3.898	Default

Figura 41. Servicios totales



	Hot Inlet Temperature [C]	Hot Outlet Temperature [C]	Cold Inlet Temperature [C]	Cold Outlet Temperature [C]	Recoverable Duty [cal/sec]	Base Area [sqm]	Overall Heat Trans. Coeff Method	Overall Heat Trans. Coeff Value [cal/sec-sqcn	Hot Side Fluid	Cold Side Fluid
E+04	125.0	124.0	36.0	36.0	3.159E+04	0.3761	Default	0.1	LP Steam	To Reboiler@B2_TO_PENTANO
E+04	32.5	31.9	20.0	25.0	0.0	7.128	Default	0.0	To Condenser@B2_TO_S5	Cooling Water
E+05	64.6	64.5	30.0	35.0	0.0	134.6	Default	0.0	To Condenser@B6_TO_METANOL	Air
E+04	53.8	41.5	20.0	25.0	0.0	8.902	Default	0.0	To Condenser@DE_TO_ACETONA	Cooling Water
E+04	57.6	44.5	30.0	35.0	0.0	102.1	Default	0.0	To Condenser@B5_TO_S10	Air
E+04	125.0	124.0	76.9	88.9	0.0	2.182	Default	0.1	LP Steam	To Reboiler@B5_TO_S11
E+04	125.0	124.0	70.3	76.6	0.0	2.58	Default	0.1	LP Steam	To Reboiler@DE_TO_S9
E+05	125.0	124.0	98.7	99.8	0.0	3.898	Default	0.1	LP Steam	To Reboiler@B6_TO_S16

Figura 42. Servicios totales

Conclusiones

Después de haber realizado una exhaustiva investigación acerca de las diferentes propiedades que contenía la mezcla problema (formación de azeótropos, puntos de ebullición, agentes extractantes), encontramos que la forma más adecuada para realizar la primera separación fue la extracción líquido-líquido. Esto ayudó significativamente a lograr las demás separaciones, ya que mediante columnas de destilación ordinarias y una sola columna extractiva, se logró separar individualmente cada uno de los componentes a las purezas requeridas o cercanas a las mismas.

Por lo tanto, la identificación de las diferentes características de la mezcla pudo ser logrado gracias a la aplicación de todos los conocimientos que fueron adquiridos a lo largo del curso dándonos como resultado el tener las condiciones óptimas al inicio para construir una secuencia de separación funcional.

Referencias

- Valoyes Escobar, R. y Nieto Cortés, L. A. (2018) *Criterios de selección para un agente material de separación en un proceso de deshidratación de etanol por destilación extractiva*. Semilleros: Formación Investigativa. 4(1), 39-48 Retrieved from http://hdl.handle.net/20.500.11839/7734

- Gil, I. D., Uyazán, A. M., Aguilar, J. L., Rodríguez, G., & Caicedo, L. A. (2008). *Separation of ethanol and water by extractive distillation with salt and solvent as entrainer: process simulation. Brazilian Journal of Chemical Engineering, 25(1), 207–215.* doi:10.1590/s0104-66322008000100021

- Castier, M., & Sandler, S. I. (1997). *Critical points with the Wong-Sandler mixing rule—I. Calculations with the van der Waals equation of state. Chemical Engineering Science, 52(19), 3393–3399.* doi:10.1016/s0009-2509(97)00142-5.

- Yongjin C, Jianping W, Gang X and Lirong Y. Separation of -cyano-3-phenoxybenzyl alcohol from -cyano-3-phenoxybenzyl acetate using solvent extraction. Separation and Purification Technology. 2006;51:424-429.

- Guo-guang N, Yu-chun X, Jian-feng L and Hui-zhou L. Isolation and purification of glycyrrhizic acid with solvent extraction. Separation and Purification Technology. 2005;44:189-196.